

4. Таким образом, показано, что для ЭС структуры $\text{Al/Si}_3\text{N}_4/n\text{-Si}$ в режиме обогащения следует учитывать сопротивление $n\text{-Si}$, а в режиме сильной инверсии — дополнительную частотную дисперсию импеданса в области пространственного заряда.

Работа выполнена в рамках ГПНИ «Электроника и фотоника» (задание 1.1.03).

ЛИТЕРАТУРА

1. Технология СБИС. В 2-х книгах / Под ред. С. Зи. — М.: Мир, 1986. — 404 с. + 453 с.
2. Sze, S.M. Physics of semiconductor devices / S.M. Sze, K.K. Ng. — N.Y.: Wiley, 2007. — 832 p.
3. Гриценко, В.А. Электронная структура нитрида кремния / В.А. Гриценко // УФН. — 2012. — Т. 182, № 5. — С. 531–541.
4. Насыров, К.А. Туннельная инжекция дырок через ловушки в SiO_2 : эксперимент и теория / К.А. Насыров, С.С. Шаймеев, В.А. Гриценко // ЖЭТФ. — 2009. — Т. 136, № 5(11). — С. 910–918.
5. Two constant phase element behaviour of the admittance characteristics of GaAs metal-insulator-semiconductor structure with deep traps / S. Kochowski [et al.] // Thin Solid Films. — 2003. — V. 444, № 1-2. — P. 208–214.

ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКИЙ ВИБРАТОР ИЗ ГРАФЕНА: УСЛОВИЯ ГЕНЕРАЦИИ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КОЛЕБАНИЙ

Н. А. Поклонский, Е. Ф. Кисляков, С. А. Вырко, С. В. Раткевич

Белорусский государственный университет, poklonski@bsu.by

Методом Пуанкаре–Боголюбова исследованы нелинейные уравнения, описывающие электромеханический вибратор на основе графена, и установлены величины параметров системы, при которых происходит генерация электрических колебаний вибрирующим графеном (подвижным катодом).

ВВЕДЕНИЕ

Исследование автоколебательных систем (т. е. систем с малым по сравнению с периодом возникающих автоколебаний временем взаимодействия с источником энергии) актуально как для физики нелинейных явлений в классических и квантовых системах, так и для приложений (см., например, обзоры [1, 2]). Расширяется круг материалов, используемых в качестве элементов автоколебательных систем. Так, в работе [3] была предложена конструкция генератора переменного напряжения с нанополоской графена в качестве основного элемента (см. рис. 1), и показана возможность генерации электрических колебаний в линейном приближении.

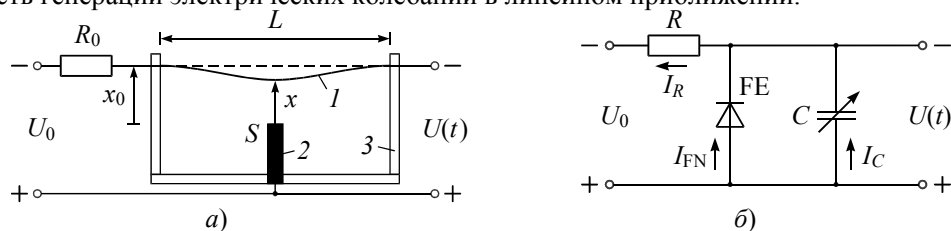


Рис. 1. а) конструкция электромеханического вибратора: 1 — нанополоска графена (катод), 2 — анод, 3 — диэлектрик; б) эквивалентная электрическая цепь устройства: FE — автоэмиссионный диод

Графеновая нанополоска длиной L , шириной W и массой M находится на расстоянии x_0 от плоского анода площадью S . Пусть в отсутствие внешнего напряжения основная мода ее поперечных колебаний имеет угловую частоту ω_0 и механические колебания происходят с добротностью Q . При подаче постоянного напряжения U_0 на нанополоску кроме упругих сил действует электростатическая сила $F_e = CU^2/x$, где C и U — емкость и разность электрических потенциалов между нанополоской и анодом, x — расстояние от анода до графена; напряженность поля $E = U/x$. Электрическая емкость системы аппроксимируется емкостью плоского конденсатора $C = \varepsilon_0 S/x$, где ε_0 — электрическая постоянная. Правила Кирхгофа для схемы на рис. 1б дают: $U_0 = U + I_R R$; $I_R = I_{FN} + I_C$, где $R = R_0 + R_g$ — суммарное электрическое сопротивление нагрузки R_0 и нанополоски R_g ; $I_C = -dq/dt = -d(CU)/dt = -\varepsilon_0 S dE/dt$ — ток через емкость (с зарядами $\pm q$ на обкладках). Зависимость автоэмиссионного тока I_{FN} из графена от напряженности E электрического поля на его поверхности описывается формулой Фаулера – Нордгейма: $I_{FN} = [Sa(\beta E)^2/\Phi] \exp[-b\Phi^{3/2}/(\beta E)]$, где $\Phi \approx 4$ эВ — работа выхода π -электрона из графена, β — фактор усиления электрического поля за счет структуры поверхности катода, $a = 1.54 \cdot 10^{-6}$ А·эВ/В², $b = 6.83 \cdot 10^7$ В/(эВ^{3/2}·см). Цель работы — исследовать описывающие вибратор нелинейные уравнения методом Пуанкаре–Боголюбова [4–6] и определить величины параметров системы, при которых происходит генерация электрических колебаний в электромеханической цепи.

ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Система нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающих вибратор, имеет вид [3]:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} + \frac{\omega_0}{Q} \frac{dx}{dt} + \omega_0^2 (x - x_0) = -\frac{\varepsilon_0 S}{M} E^2, \quad \frac{U_0}{R} = \frac{Ex}{R} + AE^2 \exp(-B/E) - \varepsilon_0 S \frac{dE}{dt}, \quad (1)$$

где $A = Sa\beta^2/\Phi$ и $B = b\Phi^{3/2}/\beta$. Обозначим x_{eq} и E_{eq} равновесные значения смещения x и поля E , которые получаются при равенстве нулю производных по времени в уравнениях (1). Введем безразмерные переменные, характеризующие отклонение системы от положения равновесия: $X = (x - x_{eq})/x_{eq}$, $Z = (E - E_{eq})/E_{eq}$, а также безразмерное время $T = t/\tau$, где $\tau = \varepsilon_0 SR/[x_{eq} + AR(2E_{eq} + B) \exp(-B/E_{eq})]$ — постоянная времени электрической части системы (см. [3]). Производную от X по T обозначим \dot{X} . В переменных (X, Y, Z) система (1) принимает следующий стандартный вид:

$$\dot{X} = Y, \quad \dot{Y} = -\omega_0^2 \tau^2 X - \frac{\omega_0 \tau}{Q} Y - \frac{\varepsilon_0 S E_{eq}^2 \tau^2}{M x_{eq}} (2Z + Z^2), \quad \dot{Z} = \frac{x_{eq} \tau}{\varepsilon_0 SR} [X + Z + XZ - (1 + Z)f(Z)], \quad (2)$$

где $f(Z) = \frac{AE_{eq}R}{x_{eq}(1+Z)} \exp\left(-\frac{B}{E_{eq}}\right) \left[1 - (1+Z)^2 \exp\left(\frac{BZ}{E_{eq}(1+Z)}\right)\right]$. Очевидно, что $f(0) = 0$.

Из третьего уравнения системы (2) имеем:

$$X = [\varepsilon_0 SR/(x_{eq} \tau)] [\dot{Z}/(1+Z)] - Z/(1+Z) + f(Z). \quad (3)$$

Подстановка (3) во второе уравнение (с учетом первого уравнения) системы (2) приводит к обыкновенному дифференциальному уравнению третьего порядка относительно Z :

$$\ddot{Z}(1+Z)^2 - 3\dot{Z}\ddot{Z}(1+Z) + 2\dot{Z}^3 + (\omega_0\tau/Q)[\ddot{Z}(1+Z) - \dot{Z}^2](1+Z) + \omega_0^2\tau^2\dot{Z}(1+Z)^2 + \\ + \frac{E_{\text{eq}}^2\tau^3}{MR}(Z^2 + 2Z)(1+Z)^3 + \frac{x_{\text{eq}}\tau}{\varepsilon_0 SR} \left\{ 2\dot{Z}^2 - \ddot{Z}(1+Z) + \omega_0^2\tau^2 \left[f(Z) - \frac{Z}{1+Z} \right] (1+Z)^3 + \right. \\ \left. + \frac{\omega_0\tau}{Q} \left(\dot{Z}f'(Z) - \frac{\dot{Z}}{(1+Z)^2} \right) (1+Z)^3 + [\ddot{Z}f'(Z) + \dot{Z}^2 f''(Z)](1+Z)^3 \right\} = 0, \quad (4)$$

где сверху величины Z точками обозначено дифференцирование по безразмерному времени T , а штрихами возле f – по Z . Линейная часть уравнения (4) приведена в [3]. В безразмерных переменных она имеет вид:

$$\ddot{Z} + \ddot{Z}\tau \left(\frac{\omega_0}{Q} - \frac{1}{\tau} \right) + \dot{Z}\tau^2 \left(\omega_0^2 - \frac{\omega_0}{Q\tau} \right) + Z\tau^3 \left(\frac{2E_{\text{eq}}^2}{MR} - \frac{\omega_0^2}{\tau} \right) = 0. \quad (5)$$

Необходимым условием существования периодического (при $T \rightarrow \infty$) решения у (4) является наличие такового у (5). Периодическое (при $T \rightarrow \infty$) решение уравнения (5) означает, что его характеристическое уравнение имеет один действительный отрицательный корень $-\lambda$ и пару комплексно-сопряженных чисто мнимых корней $\pm i\omega$. Тогда по теореме Виета $-\lambda = 1 - \tau\omega_0/Q$ и $\omega^2 = [2E_{\text{eq}}^2\tau^3/(MR) - \omega_0^2\tau^2]/(1 - \tau\omega_0/Q)$. Также по теореме Виета должно выполняться условие:

$$\omega_0(1/\tau - \omega_0/Q)[\omega_0 - 1/(Q\tau)] = [\omega_0^2/\tau - 2E_{\text{eq}}^2/(MR)]. \quad (6)$$

Квадратное уравнение (6) относительно τ можно рассматривать как условие, определяющее значение τ , при котором существует периодическое решение. Решение уравнения (6) есть:

$$1/\tau = \omega_0/(2Q) \pm \{[\omega_0/(2Q)]^2 + 2E_{\text{eq}}^2Q/(MR\omega_0) - \omega_0^2\}^{1/2}.$$

Поскольку $1/\tau$ должно быть положительной действительной величиной меньше ω_0/Q , то для осциллятора с параметрами ω_0 , M , Q получаем допустимые значения E_{eq} из условия: $[\omega_0^3M/(2Q)][1 - 1/(4Q^2)] \leq E_{\text{eq}}^2/R < \omega_0^3M/(2Q)$, где равенство соответствует случаю, когда (6) имеет единственный двукратный корень $1/\tau = \omega_0/(2Q)$. Итак, генерация возможна в узкой области значений E_{eq} вблизи значения $E_{\text{eq}} \approx [\omega_0^3MR/(2Q)]^{1/2}$. При этом произвольная величина сопротивления R позволяет подогнать рабочую точку E_{eq} (равновесное значение напряженности электрического поля) к параметрам осциллятора ω_0 , M , Q . Этим фиксируются неопределенные параметры устройства x_0 и U_0 . В соответствии с [4–6] первым приближением к периодическому решению (4) (предельному циклу) будет $X(T) = K \cos(\omega T)$, где амплитуда предельного цикла K находится из условия отсутствия гармоник на основной частоте ω в нелинейной части уравнения (4). Разлагая $f(Z)$ в ряд Тейлора и ограничиваясь членами до пятого порядка по Z , получаем из условия равенства нулю суммы коэффициентов перед третьей и пятой степенью нелинейности (четные степени нелинейности не дают вклада в основную гармонику) значение K , которое должно быть действительным в пределах $0 < K < 1$ (если $K > 1$ то графеновая полоска касается анода при колебаниях). Последнее условие сводится к $(AE_{\text{eq}}R/x_{\text{eq}}) \exp(-B/E_{\text{eq}}) > 1$, где $A \propto \beta^2$, $B \propto 1/\beta$. Для разумных значений $U_0 \sim 10$ В оно выполняется при коэффициенте усиления поля $\beta \sim 1000$, типичном значении для приборов с автоэлектронной эмиссией. При переходе к высоким частотам ($\omega_0/2\pi$ порядка 10^{13} Гц) необходимо учитывать действие на осциллятор его собственного электромагнитного излучения, что приводит к обычно-

венному дифференциальному уравнению четвертого порядка относительно Z , которое может быть исследовано аналогичным приведенному здесь образом.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом Пуанкаре–Боголюбова исследованы нелинейные уравнения, описывающие электромеханический вибратор из графена. Установлено, что генерация электрических колебаний возможна в узкой области значений равновесной напряженности электрического поля E_{eq} вблизи значения $E_{\text{eq}} \approx [\omega_0^3 MR / (2Q)]^{1/2}$ и факторе усиления электрического поля вблизи катода $\beta \sim 1000$.

Работа поддержана программой «Конвергенция» и БРФФИ (грант Ф14МН-009).

ЛИТЕРАТУРА

1. Саранин, В.А. Электростатические осцилляторы / В.А. Саранин // УФН. 2012. Т. 182, № 7. С. 749–758.
2. Анищенко, В.С. Теория возвратов Пуанкаре и её приложение к задачам нелинейной физики / В.С. Анищенко, С.В. Астахов // УФН. 2013. Т. 183, № 10. С. 1009–1028.
3. Poklonski, N.A. Electromechanical vibrator based on graphene / N.A. Poklonski, E.F. Kislyakov, S.A. Vyrko // Теории оболочек и мембран в механике и биологии: от макро- до наноразмерных структур: матер. междунар. науч. конф., 16–20 сент. 2013 г., Минск / под общ. ред. Г.И. Михасева, Х. Альтенбаха. Минск: Изд. центр БГУ, 2013. С. 105–108.
4. Пуанкаре, А. Избранные труды: В 3 т. / А. Пуанкаре. М.: Наука, 1971–1974. Т. 1: Новые методы небесной механики. 1971. 772 с.
5. Андронов, А.А. Теория колебаний / А.А. Андронов, А.А. Витт, С.Э. Хайкин. М.: Наука, 1981. 568 с.
6. Боголюбов, Н.Н. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний / Н.Н. Боголюбов, Ю.А. Митропольский. М.: Наука, 1974. 504 с.

МАГНИТНЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИ НЕЙТРАЛЬНОЙ МОЛЕКУЛЫ ФТАЛОЦИАНИНА ОЛОВА

Н. А. Поклонский, С. В. Раткевич, С. А. Вырко, Е. Ф. Кисляков

Белорусский государственный университет, poklonski@bsu.by

Рассчитаны спиновые состояния ($S = 0, 1, 2, 3, 4$) электрически нейтральной молекулы фталоцианина олова ($\text{C}_{32}\text{H}_{16}\text{N}_8\text{Sn}$ или SnPc) при мультиплетностях $M = 2S + 1$ методом функционала локальной спиновой плотности (DFT, LSDA) в программе Gaussian09. Магнитный момент молекулы SnPc равен $M - 1 = 2S$ (в единицах магнетона Бора μ_B). Показано, что энергия молекулы монотонно увеличивается при увеличении ее мультиплетности.

ВВЕДЕНИЕ

Перспективы применения молекулярного магнетизма в спинтронике ставят вопрос о расширении номенклатуры макромолекул, обладающих электрическим и магнитным дипольными моментами [1–4]. К таким молекулам относятся металлсодержащие молекулы фталоцианинов [5, 6], в частности молекула фталоцианина олова ($\text{C}_{32}\text{H}_{16}\text{N}_8\text{Sn}$ или SnPc). У воронкообразной молекулы фталоцианина олова [7, 8], также как и у молекулы фталоцианина свинца [9, 10], атом металла находится вне